



TITLE:

# HOPG基板上における分子配列のモデリング

AUTHOR(S):

廣瀬, 崇至

---

CITATION:

廣瀬, 崇至. HOPG基板上における分子配列のモデリング. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 44-44

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230744>

RIGHT:

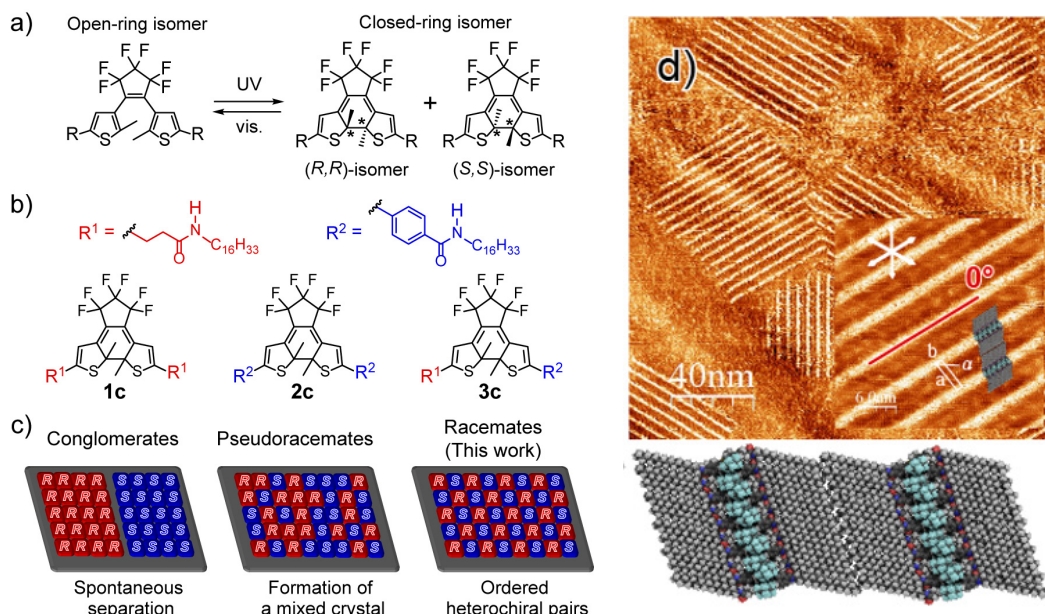
HOPG 基板上における分子配列のモデリング  
Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 廣瀬 崇至

研究成果概要

単一分子のキラリティーが超分子構造体のキラリティーにどのように影響するかは、超分子化学における重要な課題の1つである。本研究では、フォトクロミック分子であるジアリールエテン **1-3** の合成を行い、固液界面において形成される二次元分子配列のキラリティーについて走査型トンネル顕微鏡を用いて検討を行った。

フォトクロミック化合物であるジアリールエテンは、紫外光照射に伴い(*R,R*)-体および(*S,S*)-体のエナンチオマーを生じる (Figure 1a)。これまでの研究により、化合物 **1c** と **2c** は、オクタン酸/グラファイト界面においてエナンチオマーの自然分晶 (conglomerates)、および、固溶体 (pseudoracemates) の二次元結晶を形成することが明らかとなった (Figure 1b,c)。これに対して、左右非対称の構造を持つ化合物 **3c** はラセミ結晶 (racemates) を形成することが STM 観察により示唆された (Figure 1d)。Materials Studio を用いた分子力学計算により、化合物 **3c** のラセミ結晶分子配列を再現することに成功した。



**Figure 1.** (a) Photoisomerization reaction of diarylethenes. (b) Chemical structures of diarylethenes and (c) their manner of 2D chiral self-assemblies formed at the liquid/graphite interface. (d) STM image of **3c** at the octanoic acid/graphite interface (top) and molecular model (bottom).

発表論文(謝辞なし)

1. N. Maeda, T. Hirose, K. Matsuda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 2371–2375
2. N. Nishitani, T. Hirose, K. Matsuda, *Langmuir* **2017**, 33, 9151–9159.